

Electronic Supplementary Information

From porphyrins to pyrphyrins: Adsorption study and metalation of a molecular catalyst on Au(111)

Gerson Mette^{1,2,*}, Denys Sutter¹, Yeliz Gurdal³, Stephan Schnidrig³, Benjamin Probst³,
Marcella Iannuzzi³, Jürg Hutter³, Roger Alberto³, and Jürg Osterwalder^{1,*}

¹Physik-Institut, Universität Zürich, CH-8057 Zürich, Switzerland

²Current address: Fachbereich Physik, Philipps-Universität Marburg,
D-35037 Marburg, Germany

³Institut für Chemie, Universität Zürich, CH-8057 Zürich, Switzerland

* corresponding authors: Gerson Mette, E-mail: gerson.mette@physik.uni-marburg.de
and Jürg Osterwalder, E-mail: osterwal@physik.uzh.ch

1 XPS of Co 2p

Fig. S1(a) shows the Co 2p_{3/2} spectrum of the metalated pyrphyrin monolayer, obtained after annealing at 523 K. Its deconvolution into five components (I-V) has already been discussed in the main text. Four components (I-IV) represent Co species incorporated within Pyr molecules whereas the fifth component (V) is related to metallic Co species present either in remaining Co clusters or incorporated into the Au(111) surface layer beneath the molecules. This metallic component is also found after evaporation of cobalt onto the clean Au(111) surface as shown in Fig. S1(c).

Fig. S1(b) presents the evolution of the Co 2p_{3/2} spectra as a function of the annealing temperature. The spectra have been fitted with the same five components as the spectrum of Fig. S1(a). Additionally, the peak ratios of the four peaks (I-IV) have been fixed at the values obtained for the fit of Fig. S1(a). The resulting integrated peak intensities of the fitted spectra are shown in Fig. S2. After Co deposition at 323 K a dominant metallic component (V) is observed. With increasing annealing temperature, the intensity of this metallic component is decreasing, in particular for temperatures above 373 K. Simultaneously, the intensities of the components (I-IV)

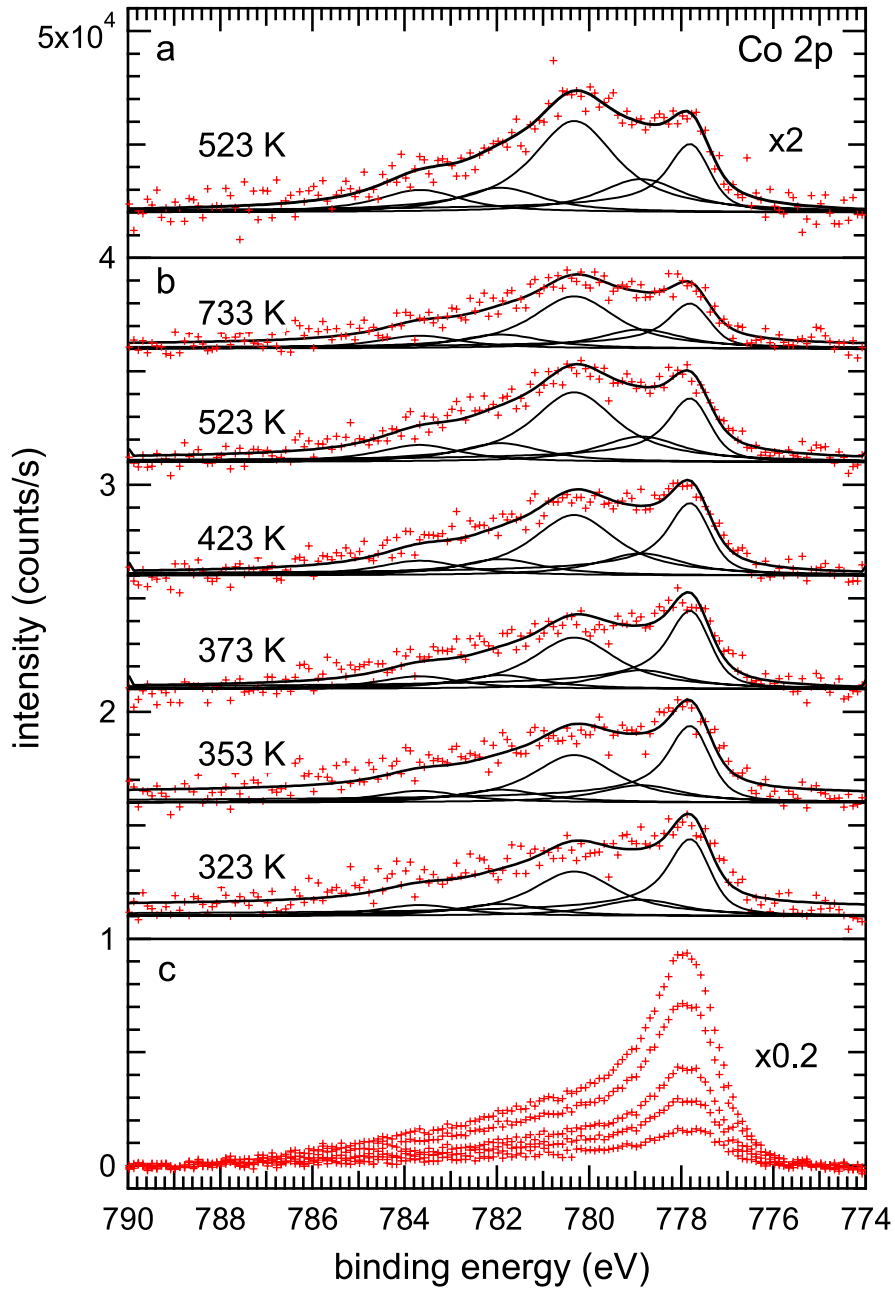


Figure S1: (a) Co 2p_{3/2} spectrum after Co evaporation on a monolayer Pyr/Au(111) surface and subsequent annealing at 523 K fitted with three main components at binding energies of $E_B = 780.4$ eV (I), 778.7 eV (IV) and 777.7 eV (V) and two additional satellites at 782.0 eV (II) and 783.7 eV (III). (b) Evolution of the Co 2p_{3/2} spectra as a function of the annealing temperature fitted with the same five components. (c) Co 2p_{3/2} spectra after the deposition of 0.09 ML, 0.18 ML, 0.25 ML, 0.39 ML and 0.51 ML Co on the clean Au(111) substrate.

are increasing up to annealing temperatures of 523 K. However, the increase of the intensities of the components (I-IV) is larger than the intensity decrease of component (V) (c.f. Fig. S2). This concomitant increase of the total intensity of the Co 2p_{3/2} spectra is most likely related to the decreasing attenuation of Co atoms dissolving from the clusters and/or ascending from below the molecular layer during metalation. After annealing at 723 K the ratio of the peaks (I-IV) to the peak (V) stays almost constant, however, the Co 2p_{3/2} intensities decrease considerably. This decrease indicates the decomposition of some CoPyr molecules and the partial disappearance of Co.

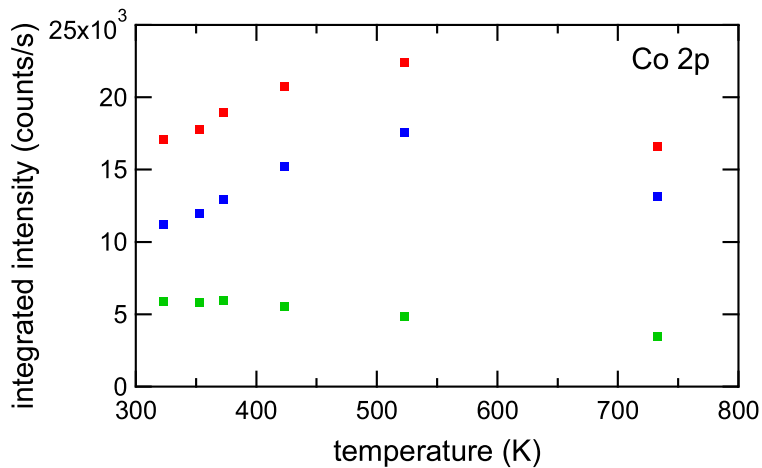


Figure S2: Integrated peak intensities of the fitted Co 2p_{3/2} spectra shown in Fig. S1(b) as a function of the annealing temperature. While the total intensity of the Co 2p_{3/2} spectra (red) and the sum of the peaks (I-IV) (blue) attributed to Co ligated to the Pyr centers are increasing up to annealing temperatures of 523 K the intensity of peak (V) (green) corresponding to the metallic Co is decreasing continuously in particular for temperatures above 373 K. After the annealing at 723 K the Co 2p_{3/2} peak intensities decrease considerably while the intensity ratio of the peaks (I-IV) to the peak (V) is almost constant.

2 XPS of C 1s

The C 1s spectra shown in Fig. S3 reveal two peaks at binding energies of 286.1 eV and 284.7 eV. The observed intensity ratio of about 10 : 14 fits very well with the number of C atoms with and without a neighboring N atom, respectively. As Co is not coordinated to any C atom, consistently, no pronounced changes are observed during metalation upon annealing temperatures of 523 K. However, annealing at 723 K leads to spectral changes that suggest some rearrangements within the molecules.

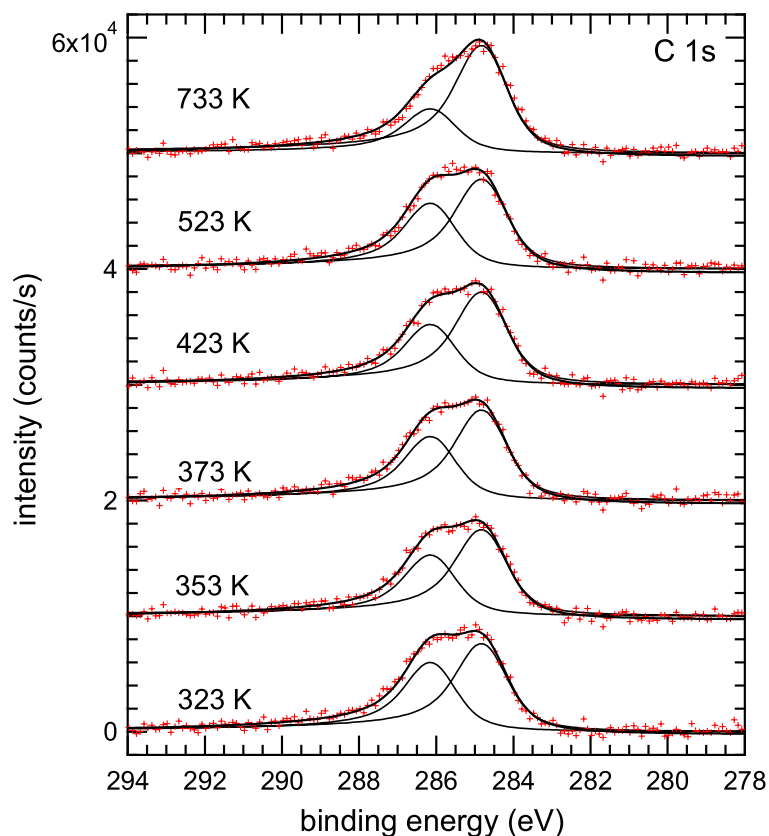


Figure S3: Evolution of the C 1s spectra as a function of the annealing temperature fitted with two components at binding energies of $E_B = 286.1$ eV and 284.7 eV.

3 PDOS on Different Surface Domains

Fig. S4 shows the comparison of the density of states (DOS) projected on Au atoms located on fcc site for both the CoPyr adsorbed case and the bare surface. Bare and CoPyr adsorbed fcc surface Au atoms have similar electronic structure which confirms the dominated van-der-Waals type of interactions between molecule and substrate.

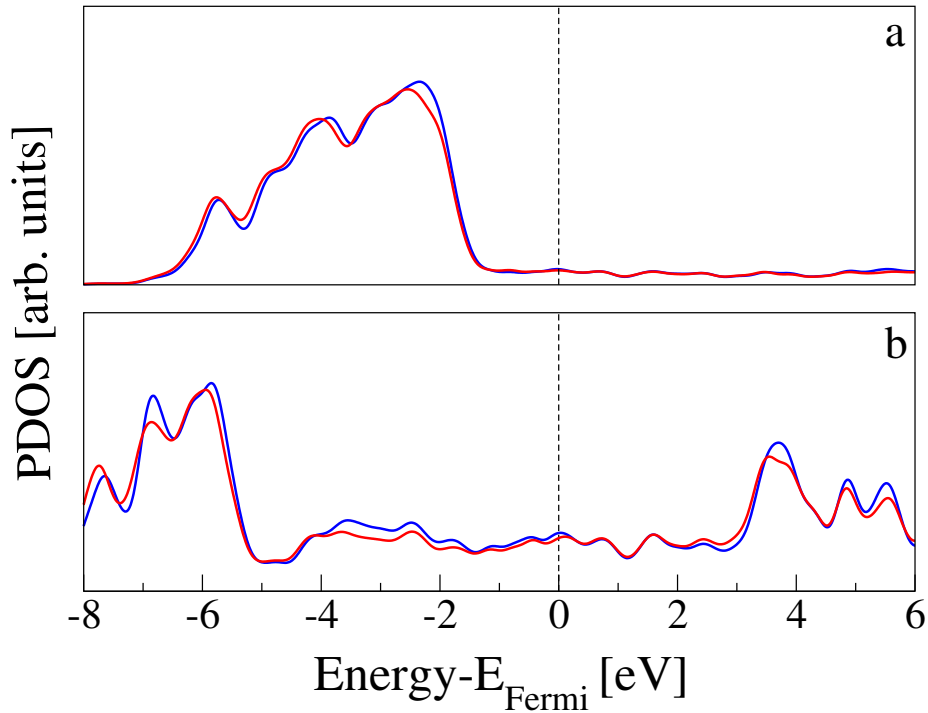


Figure S4: Comparison of the DOS projected on fcc site of the Au surface for the bare surface (blue solid line) and the CoPyr adsorbed surface (red solid line). (a) Au 5d band and (b) Au 6s band.

We also adsorbed CoPyr on different sites of the reconstructed surface to investigate whether adsorption strength and electronic structure are dependent on different surface domains. CoPyr is adsorbed with 60° tilted angle with respect to the $[110]$ direction of fcc, hcp and transition regions. Fig. S5 (a) and (b) show the PDOS on the bare surface and the CoPyr adsorbed surface, respectively. Calculated adsorption energies are nearly the same for the three domains. PDOS results show that Au 5d states are also very similar for fcc, hcp and transition regions [1].

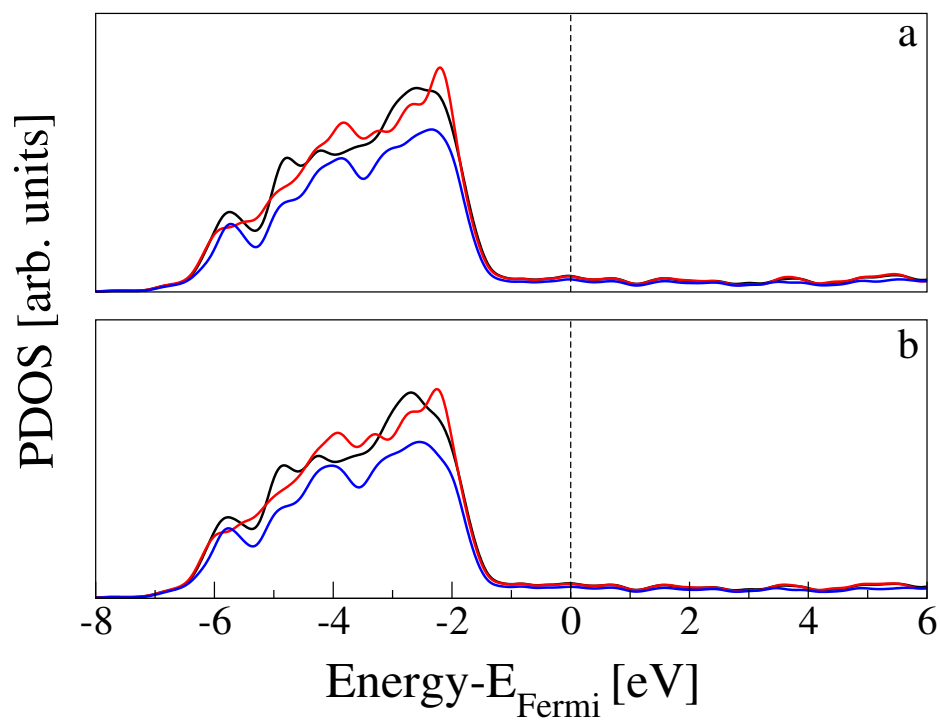


Figure S5: Comparison of the DOS projected on different domains of the Au surface for the pristine (a) and the CoPyr adsorbed surface (b). Blue solid line represents PDOS on Au atoms that are in fcc site, red for Au atoms in hcp site and black for Au atoms in transition site.

4 Pyr and CoPyr-2H on Reconstructed Au(111) Surface

Fig. S6 shows the optimized configurations of Pyr and CoPyr-2H intermediate on the reconstructed surface. Both Pyr molecule and CoPyr-2H intermediate are adsorbed 60° tilted with respect to the [110] direction. As it is discussed in the main text, the CoPyr-2H intermediate state is designed as partial insertion of Co at the pyrphyrin core while the two H atoms still bonded to N atoms pointing out of the molecular plane.

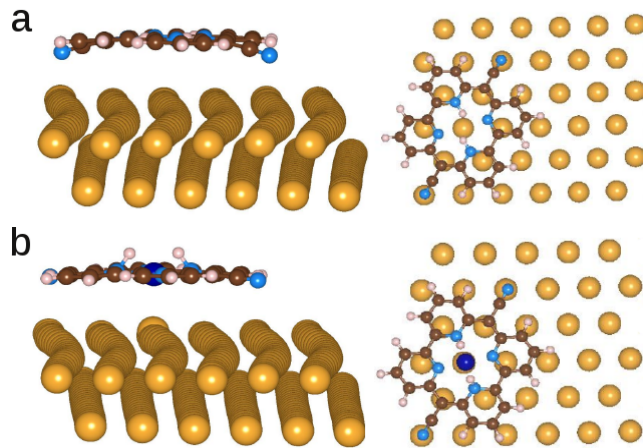


Figure S6: Optimized structures of Pyr (a) and CoPyr-2H (b) on the reconstructed Au(111) surface. While figures at left show side views, the ones at right depict top views. The molecular axis is at an angle of 60° with respect to the [110] direction for both models. For clarity only two Au layers and only the surface layer are shown on left and right panels, respectively. Color code: dark blue: Co, blue: N, brown: C, pink: H, and yellow: Au.

5 Optimized Coordinates

Cartesian coordinates (in Å) for DFT-optimized geometries of the surface structures in our electronic structure calculations.

Table S1: CoPyr on reconstructed Au(111) Surface.

Table S2: Pyr on reconstructed Au(111) Surface.

Table S3: CoPyr-2H on reconstructed Au(111) Surface.

Table S4: CoPyr monolayer on unreconstructed Au(111) Surface.

Table S1: CoPyr on reconstructed Au(111) Surface

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
Co	2.950	5.178	3.049	N	3.543	3.385	3.181	N	1.107	4.753	3.182
N	4.789	5.602	3.181	N	2.355	6.969	3.186	N	0.087	0.114	2.604
N	5.770	10.270	2.658	C	3.389	0.967	3.250	C	4.763	0.843	3.349
C	5.541	2.006	3.372	C	4.909	3.243	3.286	C	2.775	2.246	3.172
C	1.343	2.326	3.063	C	0.662	1.119	2.856	C	0.531	3.506	3.168
C	-0.883	3.367	3.234	C	-1.703	4.478	3.315	C	-1.112	5.746	3.336
C	0.276	5.847	3.276	C	5.621	4.508	3.276	C	7.009	4.610	3.334
C	7.599	5.878	3.310	C	6.779	6.990	3.234	C	5.365	6.851	3.175
C	4.552	8.031	3.087	C	5.225	9.246	2.896	C	3.121	8.109	3.182
C	0.987	7.111	3.284	C	0.355	8.349	3.364	C	1.131	9.512	3.344
C	2.505	9.389	3.253	H	2.750	0.083	3.247	H	5.229	-0.142	3.403
H	6.625	1.946	3.440	H	-1.308	2.363	3.238	H	-2.787	4.367	3.356
H	-1.725	6.644	3.389	H	7.623	3.713	3.387	H	8.683	5.990	3.348
H	7.203	7.994	3.241	H	-0.731	8.407	3.423	H	0.664	10.497	3.391
H	3.143	10.273	3.257	Au	-0.044	-0.017	0.128	Au	2.849	0.044	0.062
Au	5.703	0.080	0.102	Au	8.538	0.142	0.159	Au	11.348	0.218	0.171
Au	14.145	0.317	0.193	Au	16.933	0.428	0.208	Au	19.722	0.535	0.193
Au	22.519	0.633	0.166	Au	25.331	0.709	0.141	Au	28.158	0.756	0.124
Au	30.995	0.776	0.117	Au	33.836	0.770	0.119	Au	36.669	0.739	0.128
Au	39.491	0.679	0.149	Au	42.296	0.591	0.180	Au	45.090	0.487	0.198
Au	47.879	0.375	0.191	Au	50.673	0.267	0.176	Au	53.477	0.170	0.159
Au	56.295	0.095	0.140	Au	59.127	0.050	0.129	Au	61.965	0.026	0.107
Au	1.423	2.603	0.008	Au	4.281	2.612	-0.003	Au	7.126	2.648	0.103
Au	9.942	2.726	0.181	Au	12.746	2.819	0.183	Au	15.539	2.925	0.202
Au	18.326	3.036	0.203	Au	21.118	3.140	0.179	Au	23.923	3.227	0.154
Au	26.742	3.289	0.132	Au	29.575	3.323	0.118	Au	32.415	3.331	0.116
Au	35.254	3.311	0.122	Au	38.082	3.266	0.138	Au	40.896	3.192	0.166
Au	43.695	3.094	0.190	Au	46.485	2.985	0.196	Au	49.276	2.873	0.187
Au	52.075	2.770	0.167	Au	54.887	2.684	0.149	Au	57.715	2.623	0.139

Au	60.557	2.592	0.130	Au	63.408	2.583	0.064	Au	-0.022	5.148	-0.005
Au	2.848	5.155	0.309	Au	5.701	5.169	-0.005	Au	8.538	5.233	0.123
Au	11.344	5.324	0.188	Au	14.142	5.424	0.192	Au	16.932	5.534	0.205
Au	19.721	5.643	0.191	Au	22.518	5.740	0.167	Au	25.330	5.815	0.142
Au	28.157	5.863	0.126	Au	30.995	5.884	0.115	Au	33.836	5.878	0.116
Au	36.670	5.845	0.130	Au	39.491	5.785	0.153	Au	42.297	5.699	0.178
Au	45.091	5.595	0.193	Au	47.881	5.482	0.195	Au	50.674	5.373	0.177
Au	53.480	5.278	0.157	Au	56.301	5.203	0.139	Au	59.138	5.154	0.139
Au	61.983	5.140	0.102	Au	1.403	7.691	0.009	Au	4.275	7.702	0.018
Au	7.128	7.760	0.064	Au	9.946	7.834	0.160	Au	12.747	7.924	0.195
Au	15.539	8.032	0.203	Au	18.327	8.143	0.198	Au	21.120	8.247	0.179
Au	23.924	8.335	0.154	Au	26.743	8.396	0.134	Au	29.575	8.430	0.120
Au	32.416	8.438	0.112	Au	35.255	8.419	0.121	Au	38.083	8.372	0.140
Au	40.896	8.298	0.165	Au	43.695	8.202	0.187	Au	46.487	8.093	0.197
Au	49.277	7.980	0.188	Au	52.075	7.876	0.168	Au	54.887	7.790	0.148
Au	57.717	7.729	0.134	Au	60.559	7.692	0.139	Au	63.409	7.686	0.101
Au	-0.030	10.229	0.103	Au	2.839	10.255	0.080	Au	5.713	10.337	0.123
Au	8.552	10.359	0.112	Au	11.357	10.430	0.176	Au	14.149	10.532	0.201
Au	16.936	10.642	0.205	Au	19.724	10.750	0.189	Au	22.521	10.847	0.166
Au	25.332	10.923	0.143	Au	28.159	10.970	0.126	Au	30.996	10.991	0.116
Au	33.836	10.985	0.116	Au	36.670	10.953	0.127	Au	39.491	10.892	0.151
Au	42.297	10.805	0.180	Au	45.091	10.701	0.195	Au	47.881	10.590	0.194
Au	50.674	10.480	0.180	Au	53.479	10.384	0.160	Au	56.298	10.310	0.137
Au	59.135	10.261	0.129	Au	61.980	10.229	0.136	Au	1.411	12.774	0.110
Au	4.262	12.845	0.112	Au	7.129	12.900	0.116	Au	9.949	12.945	0.157
Au	12.752	13.034	0.184	Au	15.542	13.140	0.208	Au	18.329	13.250	0.202
Au	21.121	13.354	0.180	Au	23.924	13.442	0.153	Au	26.744	13.504	0.132
Au	29.576	13.537	0.121	Au	32.416	13.545	0.115	Au	35.254	13.526	0.121
Au	38.083	13.480	0.136	Au	40.896	13.405	0.165	Au	43.694	13.308	0.191
Au	46.485	13.199	0.196	Au	49.276	13.088	0.187	Au	52.074	12.984	0.170
Au	54.885	12.896	0.150	Au	57.713	12.836	0.131	Au	60.556	12.799	0.125
Au	63.404	12.755	0.109	Au	-0.019	1.680	-2.366	Au	1.478	4.270	-2.382
Au	2.918	6.780	-2.377	Au	4.404	9.386	-2.366	Au	5.868	11.927	-2.359

Au	7.348	14.488	-2.378	Au	2.916	1.690	-2.420	Au	4.374	4.266	-2.417
Au	5.866	6.828	-2.418	Au	7.339	9.385	-2.374	Au	8.817	11.937	-2.371
Au	10.293	14.483	-2.362	Au	5.874	1.708	-2.401	Au	7.344	4.262	-2.394
Au	8.821	6.818	-2.373	Au	10.292	9.374	-2.361	Au	11.768	11.926	-2.354
Au	13.246	14.477	-2.353	Au	8.824	1.712	-2.366	Au	10.294	4.262	-2.355
Au	11.768	6.817	-2.350	Au	13.244	9.369	-2.346	Au	14.725	11.918	-2.347
Au	16.205	14.466	-2.346	Au	11.769	1.712	-2.357	Au	13.243	4.263	-2.353
Au	14.724	6.812	-2.350	Au	16.204	9.360	-2.347	Au	17.686	11.908	-2.349
Au	19.168	14.454	-2.351	Au	14.725	1.705	-2.350	Au	16.205	4.252	-2.349
Au	17.686	6.799	-2.350	Au	19.168	9.347	-2.353	Au	20.650	11.895	-2.357
Au	22.130	14.445	-2.359	Au	17.686	1.691	-2.348	Au	19.168	4.237	-2.351
Au	20.649	6.787	-2.355	Au	22.130	9.337	-2.359	Au	23.608	11.887	-2.364
Au	25.084	14.438	-2.367	Au	20.649	1.680	-2.354	Au	22.129	4.229	-2.359
Au	23.607	6.780	-2.362	Au	25.083	9.332	-2.366	Au	26.557	11.883	-2.369
Au	28.027	14.436	-2.372	Au	23.608	1.673	-2.363	Au	25.083	4.225	-2.366
Au	26.556	6.776	-2.369	Au	28.027	9.328	-2.371	Au	29.496	11.882	-2.373
Au	30.965	14.434	-2.374	Au	26.557	1.669	-2.370	Au	28.027	4.222	-2.372
Au	29.496	6.775	-2.373	Au	30.964	9.328	-2.375	Au	32.433	11.881	-2.375
Au	33.901	14.434	-2.374	Au	29.497	1.667	-2.374	Au	30.965	4.221	-2.375
Au	32.433	6.774	-2.375	Au	33.902	9.327	-2.375	Au	35.371	11.880	-2.374
Au	36.842	14.435	-2.371	Au	32.433	1.666	-2.374	Au	33.901	4.219	-2.374
Au	35.371	6.773	-2.373	Au	36.843	9.326	-2.371	Au	38.316	11.881	-2.367
Au	39.792	14.437	-2.363	Au	35.370	1.666	-2.373	Au	36.842	4.219	-2.371
Au	38.316	6.773	-2.367	Au	39.791	9.329	-2.363	Au	41.269	11.886	-2.359
Au	42.750	14.445	-2.354	Au	38.315	1.668	-2.367	Au	39.791	4.223	-2.362
Au	41.269	6.779	-2.359	Au	42.749	9.338	-2.356	Au	44.231	11.898	-2.353
Au	45.714	14.457	-2.353	Au	41.270	1.673	-2.358	Au	42.750	4.230	-2.355
Au	44.231	6.790	-2.354	Au	45.714	9.350	-2.353	Au	47.198	11.910	-2.354
Au	48.682	14.468	-2.356	Au	44.232	1.682	-2.353	Au	45.715	4.242	-2.354
Au	47.198	6.802	-2.353	Au	48.681	9.359	-2.355	Au	50.163	11.915	-2.356
Au	51.643	14.469	-2.358	Au	47.198	1.695	-2.355	Au	48.682	4.253	-2.355
Au	50.164	6.809	-2.357	Au	51.643	9.363	-2.358	Au	53.119	11.916	-2.359
Au	54.594	14.467	-2.361	Au	50.163	1.703	-2.358	Au	51.644	4.257	-2.360

Au	53.121	6.810	-2.361	Au	54.594	9.362	-2.362	Au	56.065	11.913	-2.365
Au	57.532	14.463	-2.367	Au	53.121	1.702	-2.360	Au	54.595	4.254	-2.363
Au	56.065	6.805	-2.364	Au	57.534	9.355	-2.366	Au	58.998	11.904	-2.367
Au	60.460	14.454	-2.370	Au	56.065	1.698	-2.363	Au	57.535	4.249	-2.362
Au	59.000	6.800	-2.362	Au	60.464	9.350	-2.364	Au	61.923	11.901	-2.370
Au	63.394	14.458	-2.348	Au	58.995	1.693	-2.366	Au	60.459	4.244	-2.370
Au	61.922	6.801	-2.379	Au	63.390	9.360	-2.379	Au	64.859	11.908	-2.375
Au	66.312	14.462	-2.359	Au	61.917	1.687	-2.377	Au	63.387	4.245	-2.404
Au	64.845	6.818	-2.423	Au	66.329	9.371	-2.401	Au	67.797	11.928	-2.379
Au	69.272	14.474	-2.389	Au	1.460	0.850	-4.787	Au	2.941	3.412	-4.800
Au	4.421	5.974	-4.799	Au	5.900	8.537	-4.787	Au	7.376	11.083	-4.775
Au	8.854	13.632	-4.776	Au	4.424	0.857	-4.793	Au	5.900	3.417	-4.789
Au	7.380	5.975	-4.786	Au	8.850	8.529	-4.769	Au	10.328	11.077	-4.770
Au	11.803	13.627	-4.768	Au	7.380	0.863	-4.782	Au	8.857	3.418	-4.775
Au	10.329	5.971	-4.768	Au	11.801	8.521	-4.765	Au	13.275	11.071	-4.763
Au	14.749	13.622	-4.763	Au	10.329	0.861	-4.771	Au	11.802	3.414	-4.769
Au	13.275	5.966	-4.765	Au	14.748	8.517	-4.763	Au	16.221	11.067	-4.763
Au	17.694	13.619	-4.764	Au	13.276	0.858	-4.766	Au	14.748	3.409	-4.764
Au	16.221	5.959	-4.764	Au	17.694	8.511	-4.763	Au	19.168	11.063	-4.765
Au	20.642	13.615	-4.767	Au	16.222	0.853	-4.764	Au	17.694	3.404	-4.764
Au	19.168	5.955	-4.764	Au	20.642	8.507	-4.767	Au	22.116	11.059	-4.771
Au	23.591	13.612	-4.773	Au	19.168	0.849	-4.765	Au	20.642	3.401	-4.767
Au	22.116	5.953	-4.770	Au	23.591	8.505	-4.773	Au	25.065	11.058	-4.776
Au	26.539	13.611	-4.778	Au	22.116	0.846	-4.770	Au	23.590	3.398	-4.773
Au	25.065	5.950	-4.776	Au	26.539	8.504	-4.778	Au	28.014	11.057	-4.780
Au	29.488	13.610	-4.781	Au	25.065	0.843	-4.775	Au	26.539	3.396	-4.778
Au	28.013	5.949	-4.779	Au	29.487	8.503	-4.781	Au	30.961	11.056	-4.782
Au	32.435	13.610	-4.782	Au	28.013	0.843	-4.780	Au	29.487	3.396	-4.781
Au	30.961	5.950	-4.782	Au	32.435	8.503	-4.782	Au	33.909	11.057	-4.782
Au	35.383	13.610	-4.780	Au	30.961	0.842	-4.782	Au	32.435	3.396	-4.783
Au	33.909	5.950	-4.782	Au	35.383	8.503	-4.781	Au	36.858	11.057	-4.779
Au	38.332	13.611	-4.776	Au	33.909	0.842	-4.782	Au	35.383	3.396	-4.781
Au	36.858	5.949	-4.778	Au	38.332	8.503	-4.776	Au	39.807	11.057	-4.773

Au	41.280	13.612	-4.770	Au	36.858	0.843	-4.778	Au	38.332	3.396	-4.776
Au	39.807	5.950	-4.773	Au	41.281	8.505	-4.770	Au	42.755	11.060	-4.767
Au	44.229	13.615	-4.766	Au	39.806	0.843	-4.772	Au	41.281	3.398	-4.770
Au	42.755	5.953	-4.767	Au	44.229	8.508	-4.766	Au	45.703	11.064	-4.765
Au	47.178	13.619	-4.766	Au	42.755	0.846	-4.767	Au	44.229	3.401	-4.766
Au	45.704	5.957	-4.766	Au	47.179	8.512	-4.765	Au	48.654	11.068	-4.766
Au	50.129	13.623	-4.767	Au	45.703	0.849	-4.765	Au	47.179	3.405	-4.766
Au	48.654	5.960	-4.766	Au	50.129	8.515	-4.767	Au	51.604	11.069	-4.768
Au	53.079	13.623	-4.769	Au	48.654	0.853	-4.767	Au	50.129	3.409	-4.768
Au	51.604	5.963	-4.769	Au	53.078	8.516	-4.770	Au	54.552	11.068	-4.772
Au	56.025	13.621	-4.774	Au	51.604	0.855	-4.768	Au	53.078	3.408	-4.770
Au	54.552	5.962	-4.773	Au	56.026	8.515	-4.773	Au	57.499	11.068	-4.775
Au	58.972	13.620	-4.777	Au	54.552	0.854	-4.772	Au	56.026	3.408	-4.772
Au	57.499	5.961	-4.773	Au	58.972	8.514	-4.775	Au	60.445	11.069	-4.777
Au	61.923	13.627	-4.769	Au	57.497	0.853	-4.775	Au	58.968	3.407	-4.775
Au	60.441	5.961	-4.778	Au	61.916	8.519	-4.779	Au	63.390	11.074	-4.780
Au	64.860	13.626	-4.775	Au	60.440	0.852	-4.778	Au	61.912	3.404	-4.784
Au	63.385	5.961	-4.795	Au	64.866	8.527	-4.795	Au	66.342	11.080	-4.784
Au	67.809	13.633	-4.775	Au	63.388	0.854	-4.776	Au	64.867	3.403	-4.773
Au	66.340	5.967	-4.796	Au	67.825	8.525	-4.769	Au	69.293	11.082	-4.778
Au	70.770	13.625	-4.774	Au	0.000	0.000	-7.223	Au	1.474	2.554	-7.223
Au	2.949	5.107	-7.223	Au	4.423	7.661	-7.223	Au	5.897	10.214	-7.223
Au	7.372	12.768	-7.223	Au	2.949	0.000	-7.223	Au	4.423	2.554	-7.223
Au	5.897	5.107	-7.223	Au	7.372	7.661	-7.223	Au	8.846	10.214	-7.223
Au	10.320	12.768	-7.223	Au	5.897	0.000	-7.223	Au	7.372	2.554	-7.223
Au	8.846	5.107	-7.223	Au	10.320	7.661	-7.223	Au	11.795	10.214	-7.223
Au	13.269	12.768	-7.223	Au	8.846	0.000	-7.223	Au	10.320	2.554	-7.223
Au	11.795	5.107	-7.223	Au	13.269	7.661	-7.223	Au	14.743	10.214	-7.223
Au	16.217	12.768	-7.223	Au	11.795	0.000	-7.223	Au	13.269	2.554	-7.223
Au	14.743	5.107	-7.223	Au	16.217	7.661	-7.223	Au	17.692	10.214	-7.223
Au	19.166	12.768	-7.223	Au	14.743	0.000	-7.223	Au	16.217	2.554	-7.223
Au	17.692	5.107	-7.223	Au	19.166	7.661	-7.223	Au	20.640	10.214	-7.223
Au	22.115	12.768	-7.223	Au	17.692	0.000	-7.223	Au	19.166	2.554	-7.223

Au	20.640	5.107	-7.223	Au	22.115	7.661	-7.223	Au	23.589	10.214	-7.223
Au	25.063	12.768	-7.223	Au	20.640	0.000	-7.223	Au	22.115	2.554	-7.223
Au	23.589	5.107	-7.223	Au	25.063	7.661	-7.223	Au	26.538	10.214	-7.223
Au	28.012	12.768	-7.223	Au	23.589	0.000	-7.223	Au	25.063	2.554	-7.223
Au	26.538	5.107	-7.223	Au	28.012	7.661	-7.223	Au	29.486	10.214	-7.223
Au	30.961	12.768	-7.223	Au	26.538	0.000	-7.223	Au	28.012	2.554	-7.223
Au	29.486	5.107	-7.223	Au	30.961	7.661	-7.223	Au	32.435	10.214	-7.223
Au	33.909	12.768	-7.223	Au	29.486	0.000	-7.223	Au	30.961	2.554	-7.223
Au	32.435	5.107	-7.223	Au	33.909	7.661	-7.223	Au	35.384	10.214	-7.223
Au	36.858	12.768	-7.223	Au	32.435	0.000	-7.223	Au	33.909	2.554	-7.223
Au	35.384	5.107	-7.223	Au	36.858	7.661	-7.223	Au	38.332	10.214	-7.223
Au	39.807	12.768	-7.223	Au	35.384	0.000	-7.223	Au	36.858	2.554	-7.223
Au	38.332	5.107	-7.223	Au	39.807	7.661	-7.223	Au	41.281	10.214	-7.223
Au	42.755	12.768	-7.223	Au	38.332	0.000	-7.223	Au	39.807	2.554	-7.223
Au	41.281	5.107	-7.223	Au	42.755	7.661	-7.223	Au	44.230	10.214	-7.223
Au	45.704	12.768	-7.223	Au	41.281	0.000	-7.223	Au	42.755	2.554	-7.223
Au	44.230	5.107	-7.223	Au	45.704	7.661	-7.223	Au	47.178	10.214	-7.223
Au	48.652	12.768	-7.223	Au	44.230	0.000	-7.223	Au	45.704	2.554	-7.223
Au	47.178	5.107	-7.223	Au	48.652	7.661	-7.223	Au	50.127	10.214	-7.223
Au	51.601	12.768	-7.223	Au	47.178	0.000	-7.223	Au	48.652	2.554	-7.223
Au	50.127	5.107	-7.223	Au	51.601	7.661	-7.223	Au	53.075	10.214	-7.223
Au	54.550	12.768	-7.223	Au	50.127	0.000	-7.223	Au	51.601	2.554	-7.223
Au	53.075	5.107	-7.223	Au	54.550	7.661	-7.223	Au	56.024	10.214	-7.223
Au	57.498	12.768	-7.223	Au	53.075	0.000	-7.223	Au	54.550	2.554	-7.223
Au	56.024	5.107	-7.223	Au	57.498	7.661	-7.223	Au	58.973	10.214	-7.223
Au	60.447	12.768	-7.223	Au	56.024	0.000	-7.223	Au	57.498	2.554	-7.223
Au	58.973	5.107	-7.223	Au	60.447	7.661	-7.223	Au	61.921	10.214	-7.223
Au	63.396	12.768	-7.223	Au	58.973	0.000	-7.223	Au	60.447	2.554	-7.223
Au	61.921	5.107	-7.223	Au	63.396	7.661	-7.223	Au	64.870	10.214	-7.223
Au	66.344	12.768	-7.223	Au	61.921	0.000	-7.223	Au	63.396	2.554	-7.223
Au	64.870	5.107	-7.223	Au	66.344	7.661	-7.223	Au	67.819	10.214	-7.223
Au	69.293	12.768	-7.223								

Table S2: Pyr on reconstructed Au(111) Surface

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
C	2.279	9.525	3.334	H	2.849	10.453	3.273	C	0.898	9.530	3.371
H	0.357	10.477	3.325	C	0.180	8.322	3.438	H	-0.906	8.342	3.431
C	0.867	7.114	3.479	N	2.234	7.144	3.476	C	2.982	8.292	3.385
C	4.403	8.212	3.309	C	5.065	9.409	3.008	N	5.619	10.402	2.678
H	2.793	6.263	3.472	N	4.621	5.788	3.471	C	5.220	7.010	3.388
C	6.634	7.144	3.340	H	7.082	8.137	3.301	C	7.427	6.009	3.358
H	8.514	6.091	3.310	C	6.814	4.754	3.410	H	7.426	3.855	3.392
C	5.414	4.685	3.472	C	0.203	5.795	3.467	C	-1.197	5.727	3.412
H	-1.810	6.625	3.406	C	-1.809	4.472	3.351	H	-2.896	4.389	3.306
C	-1.016	3.337	3.323	H	-1.464	2.343	3.277	C	0.398	3.470	3.370
N	0.996	4.693	3.457	H	2.824	4.218	3.464	C	1.215	2.269	3.288
C	0.558	1.069	2.988	N	0.014	0.068	2.662	C	2.637	2.189	3.378
N	3.383	3.337	3.473	C	4.750	3.367	3.485	C	5.437	2.158	3.452
H	6.524	2.139	3.453	C	4.720	0.950	3.384	H	5.261	0.003	3.344
C	3.339	0.956	3.338	H	2.770	0.028	3.273	Au	-0.040	-0.009	0.163
Au	2.840	0.051	0.080	Au	5.691	0.082	0.106	Au	8.524	0.143	0.160
Au	11.334	0.221	0.172	Au	14.132	0.321	0.191	Au	16.921	0.432	0.204
Au	19.711	0.540	0.190	Au	22.510	0.636	0.164	Au	25.324	0.711	0.138
Au	28.152	0.759	0.123	Au	30.991	0.779	0.118	Au	33.833	0.773	0.120
Au	36.667	0.741	0.128	Au	39.489	0.680	0.148	Au	42.295	0.592	0.179
Au	45.089	0.485	0.198	Au	47.877	0.372	0.194	Au	50.671	0.263	0.172
Au	53.475	0.167	0.152	Au	56.294	0.092	0.136	Au	59.127	0.046	0.135
Au	61.966	0.022	0.118	Au	1.419	2.605	0.042	Au	4.271	2.615	0.045
Au	7.111	2.652	0.132	Au	9.929	2.730	0.178	Au	12.733	2.823	0.180
Au	15.527	2.929	0.201	Au	18.314	3.039	0.202	Au	21.108	3.143	0.177
Au	23.914	3.230	0.150	Au	26.736	3.292	0.130	Au	29.571	3.326	0.119
Au	32.412	3.333	0.116	Au	35.252	3.314	0.122	Au	38.081	3.268	0.136
Au	40.894	3.193	0.165	Au	43.693	3.094	0.190	Au	46.484	2.982	0.196
Au	49.274	2.869	0.184	Au	52.073	2.766	0.163	Au	54.886	2.680	0.147

Au	57.715	2.619	0.138	Au	60.557	2.587	0.138	Au	63.409	2.578	0.085
Au	-0.023	5.137	0.043	Au	2.836	5.147	0.106	Au	5.688	5.168	0.060
Au	8.521	5.239	0.133	Au	11.328	5.329	0.185	Au	14.128	5.427	0.192
Au	16.918	5.537	0.204	Au	19.709	5.646	0.187	Au	22.509	5.743	0.162
Au	25.323	5.818	0.139	Au	28.152	5.866	0.125	Au	30.991	5.887	0.115
Au	33.833	5.881	0.118	Au	36.668	5.848	0.130	Au	39.490	5.787	0.152
Au	42.295	5.699	0.179	Au	45.089	5.593	0.194	Au	47.879	5.479	0.193
Au	50.673	5.369	0.175	Au	53.479	5.274	0.157	Au	56.300	5.198	0.138
Au	59.137	5.149	0.140	Au	61.984	5.133	0.107	Au	1.401	7.680	0.045
Au	4.253	7.690	0.058	Au	7.101	7.762	0.104	Au	9.924	7.836	0.168
Au	12.729	7.927	0.191	Au	15.523	8.034	0.202	Au	18.312	8.146	0.195
Au	21.108	8.251	0.174	Au	23.914	8.338	0.151	Au	26.736	8.398	0.132
Au	29.570	8.433	0.118	Au	32.412	8.441	0.113	Au	35.252	8.422	0.123
Au	38.081	8.375	0.140	Au	40.894	8.299	0.165	Au	43.694	8.201	0.187
Au	46.485	8.090	0.197	Au	49.276	7.976	0.187	Au	52.074	7.872	0.171
Au	54.886	7.786	0.147	Au	57.716	7.724	0.128	Au	60.560	7.687	0.139
Au	63.411	7.676	0.116	Au	-0.035	10.222	0.107	Au	2.823	10.249	0.080
Au	5.687	10.325	0.156	Au	8.530	10.358	0.130	Au	11.337	10.432	0.179
Au	14.132	10.533	0.195	Au	16.920	10.644	0.201	Au	19.711	10.754	0.184
Au	22.510	10.850	0.164	Au	25.323	10.925	0.142	Au	28.152	10.973	0.124
Au	30.991	10.994	0.115	Au	33.833	10.988	0.119	Au	36.668	10.955	0.130
Au	39.489	10.894	0.151	Au	42.295	10.806	0.178	Au	45.090	10.700	0.195
Au	47.879	10.586	0.195	Au	50.673	10.476	0.179	Au	53.477	10.379	0.157
Au	56.298	10.305	0.132	Au	59.135	10.256	0.126	Au	61.980	10.223	0.140
Au	1.404	12.774	0.114	Au	4.250	12.847	0.104	Au	7.115	12.897	0.120
Au	9.933	12.947	0.163	Au	12.736	13.036	0.182	Au	15.528	13.143	0.201
Au	18.316	13.254	0.195	Au	21.110	13.358	0.177	Au	23.915	13.445	0.152
Au	26.736	13.507	0.130	Au	29.571	13.541	0.120	Au	32.412	13.548	0.117
Au	35.251	13.529	0.124	Au	38.080	13.482	0.137	Au	40.894	13.406	0.164
Au	43.693	13.308	0.190	Au	46.484	13.197	0.199	Au	49.274	13.084	0.187
Au	52.072	12.980	0.164	Au	54.884	12.893	0.143	Au	57.713	12.832	0.128
Au	60.556	12.794	0.128	Au	63.404	12.755	0.116	Au	-0.018	1.674	-2.350
Au	1.454	4.255	-2.410	Au	2.918	6.805	-2.410	Au	4.404	9.379	-2.350

Au	5.862	11.919	-2.348	Au	7.340	14.484	-2.376	Au	2.920	1.693	-2.405
Au	4.385	4.261	-2.414	Au	5.864	6.818	-2.393	Au	7.332	9.377	-2.356
Au	8.809	11.931	-2.364	Au	10.285	14.479	-2.359	Au	5.868	1.709	-2.388
Au	7.338	4.260	-2.380	Au	8.811	6.816	-2.365	Au	10.284	9.370	-2.358
Au	11.761	11.921	-2.353	Au	13.242	14.473	-2.354	Au	8.814	1.710	-2.362
Au	10.287	4.260	-2.356	Au	11.760	6.814	-2.353	Au	13.238	9.364	-2.350
Au	14.721	11.914	-2.350	Au	16.204	14.464	-2.350	Au	11.762	1.708	-2.357
Au	13.240	4.260	-2.355	Au	14.720	6.808	-2.351	Au	16.201	9.354	-2.349
Au	17.685	11.903	-2.352	Au	19.168	14.451	-2.353	Au	14.722	1.702	-2.352
Au	16.203	4.248	-2.350	Au	17.684	6.794	-2.351	Au	19.168	9.343	-2.354
Au	20.650	11.893	-2.358	Au	22.130	14.441	-2.360	Au	17.686	1.689	-2.350
Au	19.167	4.234	-2.352	Au	20.650	6.783	-2.357	Au	22.131	9.335	-2.361
Au	23.609	11.885	-2.364	Au	25.085	14.437	-2.367	Au	20.650	1.677	-2.356
Au	22.130	4.226	-2.360	Au	23.609	6.778	-2.364	Au	25.084	9.330	-2.367
Au	26.557	11.882	-2.369	Au	28.028	14.436	-2.372	Au	23.609	1.671	-2.364
Au	25.084	4.224	-2.367	Au	26.557	6.776	-2.370	Au	28.027	9.329	-2.371
Au	29.497	11.883	-2.373	Au	30.965	14.436	-2.373	Au	26.558	1.669	-2.371
Au	28.028	4.222	-2.372	Au	29.497	6.775	-2.373	Au	30.965	9.330	-2.374
Au	32.433	11.883	-2.374	Au	33.901	14.436	-2.373	Au	29.498	1.668	-2.373
Au	30.966	4.222	-2.374	Au	32.433	6.776	-2.374	Au	33.902	9.330	-2.373
Au	35.370	11.882	-2.372	Au	36.840	14.436	-2.371	Au	32.433	1.668	-2.373
Au	33.901	4.221	-2.373	Au	35.370	6.775	-2.372	Au	36.841	9.328	-2.369
Au	38.314	11.882	-2.367	Au	39.790	14.437	-2.363	Au	35.369	1.668	-2.372
Au	36.840	4.222	-2.370	Au	38.314	6.775	-2.366	Au	39.789	9.329	-2.363
Au	41.267	11.886	-2.359	Au	42.747	14.443	-2.355	Au	38.313	1.669	-2.368
Au	39.789	4.224	-2.363	Au	41.267	6.779	-2.358	Au	42.747	9.337	-2.356
Au	44.229	11.896	-2.353	Au	45.712	14.455	-2.352	Au	41.268	1.672	-2.358
Au	42.747	4.229	-2.355	Au	44.229	6.788	-2.354	Au	45.712	9.348	-2.353
Au	47.196	11.908	-2.353	Au	48.679	14.465	-2.355	Au	44.229	1.680	-2.352
Au	45.712	4.240	-2.353	Au	47.195	6.800	-2.354	Au	48.679	9.357	-2.355
Au	50.162	11.912	-2.356	Au	51.642	14.468	-2.361	Au	47.196	1.692	-2.354
Au	48.679	4.251	-2.356	Au	50.162	6.807	-2.358	Au	51.643	9.360	-2.358
Au	53.120	11.912	-2.362	Au	54.595	14.465	-2.365	Au	50.161	1.700	-2.360

Au	51.642	4.255	-2.362	Au	53.120	6.808	-2.361	Au	54.595	9.359	-2.364
Au	56.067	11.910	-2.367	Au	57.535	14.461	-2.366	Au	53.120	1.701	-2.364
Au	54.594	4.253	-2.364	Au	56.066	6.802	-2.364	Au	57.536	9.352	-2.368
Au	59.002	11.903	-2.367	Au	60.463	14.452	-2.364	Au	56.065	1.696	-2.365
Au	57.535	4.246	-2.362	Au	59.002	6.796	-2.363	Au	60.467	9.346	-2.364
Au	61.926	11.898	-2.366	Au	63.396	14.457	-2.335	Au	58.998	1.689	-2.363
Au	60.461	4.240	-2.367	Au	61.925	6.796	-2.374	Au	63.389	9.352	-2.374
Au	64.857	11.905	-2.372	Au	66.311	14.462	-2.349	Au	61.920	1.685	-2.367
Au	63.387	4.242	-2.391	Au	64.846	6.808	-2.408	Au	66.322	9.363	-2.397
Au	67.791	11.922	-2.380	Au	69.265	14.474	-2.388	Au	1.460	0.851	-4.779
Au	2.942	3.409	-4.797	Au	4.423	5.972	-4.795	Au	5.897	8.532	-4.776
Au	7.372	11.078	-4.770	Au	8.850	13.629	-4.774	Au	4.423	0.857	-4.789
Au	5.902	3.414	-4.787	Au	7.375	5.973	-4.780	Au	8.844	8.526	-4.765
Au	10.323	11.074	-4.768	Au	11.798	13.625	-4.766	Au	7.375	0.860	-4.780
Au	8.852	3.416	-4.773	Au	10.323	5.969	-4.769	Au	11.795	8.519	-4.766
Au	13.270	11.070	-4.764	Au	14.745	13.621	-4.764	Au	10.324	0.859	-4.770
Au	11.798	3.411	-4.769	Au	13.271	5.964	-4.766	Au	14.744	8.515	-4.764
Au	16.218	11.066	-4.764	Au	17.693	13.618	-4.765	Au	13.272	0.856	-4.766
Au	14.746	3.408	-4.765	Au	16.219	5.959	-4.764	Au	17.692	8.510	-4.764
Au	19.167	11.062	-4.766	Au	20.642	13.615	-4.768	Au	16.220	0.852	-4.764
Au	17.693	3.403	-4.765	Au	19.167	5.955	-4.765	Au	20.642	8.507	-4.768
Au	22.117	11.060	-4.771	Au	23.591	13.612	-4.773	Au	19.167	0.848	-4.766
Au	20.642	3.400	-4.768	Au	22.116	5.953	-4.771	Au	23.591	8.505	-4.774
Au	25.066	11.059	-4.776	Au	26.540	13.612	-4.778	Au	22.117	0.846	-4.770
Au	23.591	3.398	-4.773	Au	25.066	5.951	-4.776	Au	26.540	8.505	-4.778
Au	28.014	11.058	-4.780	Au	29.488	13.611	-4.781	Au	25.066	0.844	-4.776
Au	26.540	3.397	-4.778	Au	28.014	5.951	-4.780	Au	29.488	8.504	-4.781
Au	30.961	11.057	-4.781	Au	32.435	13.610	-4.782	Au	28.014	0.844	-4.780
Au	29.488	3.397	-4.781	Au	30.962	5.950	-4.782	Au	32.435	8.504	-4.781
Au	33.908	11.057	-4.781	Au	35.383	13.611	-4.780	Au	30.962	0.843	-4.782
Au	32.435	3.396	-4.782	Au	33.909	5.950	-4.781	Au	35.382	8.504	-4.780
Au	36.857	11.057	-4.778	Au	38.331	13.611	-4.776	Au	33.909	0.843	-4.781
Au	35.383	3.396	-4.780	Au	36.857	5.950	-4.778	Au	38.331	8.503	-4.776

Au	39.805	11.057	-4.773	Au	41.279	13.612	-4.770	Au	36.857	0.843	-4.778
Au	38.331	3.396	-4.776	Au	39.805	5.950	-4.773	Au	41.280	8.505	-4.770
Au	42.754	11.060	-4.768	Au	44.228	13.615	-4.765	Au	39.805	0.844	-4.773
Au	41.280	3.398	-4.770	Au	42.754	5.953	-4.768	Au	44.228	8.508	-4.766
Au	45.703	11.064	-4.765	Au	47.177	13.619	-4.765	Au	42.754	0.846	-4.767
Au	44.228	3.401	-4.766	Au	45.703	5.956	-4.765	Au	47.178	8.512	-4.765
Au	48.653	11.068	-4.766	Au	50.128	13.622	-4.767	Au	45.702	0.849	-4.765
Au	47.177	3.404	-4.765	Au	48.652	5.960	-4.766	Au	50.128	8.516	-4.767
Au	51.604	11.069	-4.768	Au	53.079	13.622	-4.771	Au	48.652	0.852	-4.767
Au	50.127	3.408	-4.768	Au	51.603	5.963	-4.769	Au	53.078	8.516	-4.770
Au	54.554	11.068	-4.773	Au	56.028	13.621	-4.775	Au	51.603	0.854	-4.769
Au	53.078	3.408	-4.771	Au	54.553	5.962	-4.773	Au	56.028	8.514	-4.774
Au	57.502	11.067	-4.776	Au	58.975	13.620	-4.777	Au	54.554	0.854	-4.773
Au	56.027	3.408	-4.773	Au	57.500	5.960	-4.773	Au	58.975	8.512	-4.776
Au	60.448	11.068	-4.777	Au	61.925	13.625	-4.764	Au	57.500	0.852	-4.775
Au	58.970	3.404	-4.774	Au	60.443	5.958	-4.777	Au	61.917	8.516	-4.779
Au	63.390	11.072	-4.777	Au	64.860	13.627	-4.770	Au	60.443	0.850	-4.775
Au	61.912	3.401	-4.780	Au	63.386	5.957	-4.791	Au	64.865	8.523	-4.791
Au	66.339	11.080	-4.784	Au	67.806	13.632	-4.773	Au	63.389	0.850	-4.769
Au	64.858	3.395	-4.779	Au	66.336	5.966	-4.799	Au	67.825	8.534	-4.777
Au	69.294	11.081	-4.774	Au	70.767	13.621	-4.771	Au	0.000	0.000	-7.223
Au	1.474	2.554	-7.223	Au	2.949	5.107	-7.223	Au	4.423	7.661	-7.223
Au	5.897	10.214	-7.223	Au	7.372	12.768	-7.223	Au	2.949	0.000	-7.223
Au	4.423	2.554	-7.223	Au	5.897	5.107	-7.223	Au	7.372	7.661	-7.223
Au	8.846	10.214	-7.223	Au	10.320	12.768	-7.223	Au	5.897	0.000	-7.223
Au	7.372	2.554	-7.223	Au	8.846	5.107	-7.223	Au	10.320	7.661	-7.223
Au	11.795	10.214	-7.223	Au	13.269	12.768	-7.223	Au	8.846	0.000	-7.223
Au	10.320	2.554	-7.223	Au	11.795	5.107	-7.223	Au	13.269	7.661	-7.223
Au	14.743	10.214	-7.223	Au	16.217	12.768	-7.223	Au	11.795	0.000	-7.223
Au	13.269	2.554	-7.223	Au	14.743	5.107	-7.223	Au	16.217	7.661	-7.223
Au	17.692	10.214	-7.223	Au	19.166	12.768	-7.223	Au	14.743	0.000	-7.223
Au	16.217	2.554	-7.223	Au	17.692	5.107	-7.223	Au	19.166	7.661	-7.223
Au	20.640	10.214	-7.223	Au	22.115	12.768	-7.223	Au	17.692	0.000	-7.223

Au	19.166	2.554	-7.223	Au	20.640	5.107	-7.223	Au	22.115	7.661	-7.223
Au	23.589	10.214	-7.223	Au	25.063	12.768	-7.223	Au	20.640	0.000	-7.223
Au	22.115	2.554	-7.223	Au	23.589	5.107	-7.223	Au	25.063	7.661	-7.223
Au	26.538	10.214	-7.223	Au	28.012	12.768	-7.223	Au	23.589	0.000	-7.223
Au	25.063	2.554	-7.223	Au	26.538	5.107	-7.223	Au	28.012	7.661	-7.223
Au	29.486	10.214	-7.223	Au	30.961	12.768	-7.223	Au	26.538	0.000	-7.223
Au	28.012	2.554	-7.223	Au	29.486	5.107	-7.223	Au	30.961	7.661	-7.223
Au	32.435	10.214	-7.223	Au	33.909	12.768	-7.223	Au	29.486	0.000	-7.223
Au	30.961	2.554	-7.223	Au	32.435	5.107	-7.223	Au	33.909	7.661	-7.223
Au	35.384	10.214	-7.223	Au	36.858	12.768	-7.223	Au	32.435	0.000	-7.223
Au	33.909	2.554	-7.223	Au	35.384	5.107	-7.223	Au	36.858	7.661	-7.223
Au	38.332	10.214	-7.223	Au	39.807	12.768	-7.223	Au	35.384	0.000	-7.223
Au	36.858	2.554	-7.223	Au	38.332	5.107	-7.223	Au	39.807	7.661	-7.223
Au	41.281	10.214	-7.223	Au	42.755	12.768	-7.223	Au	38.332	0.000	-7.223
Au	39.807	2.554	-7.223	Au	41.281	5.107	-7.223	Au	42.755	7.661	-7.223
Au	44.230	10.214	-7.223	Au	45.704	12.768	-7.223	Au	41.281	0.000	-7.223
Au	42.755	2.554	-7.223	Au	44.230	5.107	-7.223	Au	45.704	7.661	-7.223
Au	47.178	10.214	-7.223	Au	48.652	12.768	-7.223	Au	44.230	0.000	-7.223
Au	45.704	2.554	-7.223	Au	47.178	5.107	-7.223	Au	48.652	7.661	-7.223
Au	50.127	10.214	-7.223	Au	51.601	12.768	-7.223	Au	47.178	0.000	-7.223
Au	48.652	2.554	-7.223	Au	50.127	5.107	-7.223	Au	51.601	7.661	-7.223
Au	53.075	10.214	-7.223	Au	54.550	12.768	-7.223	Au	50.127	0.000	-7.223
Au	51.601	2.554	-7.223	Au	53.075	5.107	-7.223	Au	54.550	7.661	-7.223
Au	56.024	10.214	-7.223	Au	57.498	12.768	-7.223	Au	53.075	0.000	-7.223
Au	54.550	2.554	-7.223	Au	56.024	5.107	-7.223	Au	57.498	7.661	-7.223
Au	58.973	10.214	-7.223	Au	60.447	12.768	-7.223	Au	56.024	0.000	-7.223
Au	57.498	2.554	-7.223	Au	58.973	5.107	-7.223	Au	60.447	7.661	-7.223
Au	61.921	10.214	-7.223	Au	63.396	12.768	-7.223	Au	58.973	0.000	-7.223
Au	60.447	2.554	-7.223	Au	61.921	5.107	-7.223	Au	63.396	7.661	-7.223
Au	64.870	10.214	-7.223	Au	66.344	12.768	-7.223	Au	61.921	0.000	-7.223
Au	63.396	2.554	-7.223	Au	64.870	5.107	-7.223	Au	66.344	7.661	-7.223
Au	67.819	10.214	-7.223	Au	69.293	12.768	-7.223				

Table S3: CoPyr-2H on reconstructed Au(111) Surface

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
H	3.287	3.970	4.416	H	2.611	6.390	4.417	Co	2.952	5.177	3.326
N	3.569	3.342	3.504	N	1.105	4.753	3.350	N	4.798	5.600	3.349
N	2.334	7.011	3.504	N	0.078	0.057	3.103	N	5.822	10.298	3.117
C	3.416	0.930	3.305	C	4.792	0.830	3.267	C	5.580	1.998	3.276
C	4.977	3.232	3.401	C	2.763	2.190	3.383	C	1.357	2.301	3.341
C	0.655	1.074	3.233	C	0.541	3.497	3.373	C	-0.868	3.349	3.393
C	-1.704	4.456	3.388	C	-1.135	5.727	3.395	C	0.259	5.845	3.391
C	5.644	4.507	3.395	C	7.039	4.626	3.400	C	7.608	5.897	3.386
C	6.771	7.003	3.387	C	5.362	6.856	3.372	C	4.546	8.052	3.346
C	5.248	9.280	3.242	C	3.141	8.164	3.383	C	0.926	7.121	3.394
C	0.323	8.355	3.268	C	1.112	9.523	3.265	C	2.488	9.424	3.304
H	2.790	0.038	3.255	H	5.267	-0.149	3.187	H	6.661	1.934	3.151
H	-1.284	2.342	3.411	H	-2.788	4.329	3.376	H	-1.758	6.620	3.399
H	7.662	3.733	3.410	H	8.691	6.023	3.375	H	7.187	8.010	3.404
H	-0.757	8.419	3.138	H	0.636	10.502	3.185	H	3.112	10.317	3.258
Au	-0.020	-0.000	0.144	Au	2.839	0.028	0.100	Au	5.687	0.062	0.097
Au	8.514	0.128	0.170	Au	11.324	0.214	0.175	Au	14.122	0.318	0.188
Au	16.912	0.430	0.199	Au	19.704	0.540	0.187	Au	22.504	0.638	0.162
Au	25.319	0.714	0.138	Au	28.150	0.761	0.123	Au	30.991	0.781	0.115
Au	33.835	0.775	0.117	Au	36.672	0.743	0.127	Au	39.497	0.684	0.147
Au	42.305	0.597	0.176	Au	45.100	0.491	0.195	Au	47.891	0.378	0.193
Au	50.685	0.268	0.176	Au	53.491	0.171	0.151	Au	56.313	0.095	0.132
Au	59.150	0.046	0.132	Au	61.994	0.018	0.137	Au	1.424	2.584	0.096
Au	4.266	2.609	0.042	Au	7.106	2.641	0.110	Au	9.919	2.720	0.187
Au	12.722	2.817	0.184	Au	15.517	2.927	0.198	Au	18.306	3.040	0.198
Au	21.101	3.145	0.176	Au	23.909	3.233	0.149	Au	26.733	3.294	0.130
Au	29.569	3.328	0.118	Au	32.413	3.335	0.114	Au	35.255	3.316	0.120
Au	38.087	3.271	0.135	Au	40.903	3.197	0.162	Au	43.704	3.099	0.188
Au	46.496	2.989	0.195	Au	49.288	2.875	0.187	Au	52.088	2.771	0.164

Au	54.902	2.683	0.143	Au	57.732	2.620	0.134	Au	60.577	2.583	0.142
Au	63.427	2.562	0.114	Au	-0.008	5.122	0.044	Au	2.840	5.137	0.356
Au	5.675	5.164	0.043	Au	8.510	5.227	0.143	Au	11.319	5.320	0.192
Au	14.118	5.424	0.193	Au	16.910	5.536	0.199	Au	19.702	5.647	0.188
Au	22.503	5.745	0.163	Au	25.319	5.820	0.137	Au	28.150	5.868	0.124
Au	30.991	5.888	0.115	Au	33.835	5.882	0.116	Au	36.673	5.851	0.127
Au	39.497	5.791	0.149	Au	42.305	5.704	0.177	Au	45.101	5.599	0.194
Au	47.892	5.485	0.193	Au	50.687	5.374	0.177	Au	53.493	5.278	0.154
Au	56.316	5.201	0.137	Au	59.155	5.149	0.142	Au	62.001	5.127	0.120
Au	1.410	7.667	0.053	Au	4.256	7.689	0.106	Au	7.099	7.753	0.114
Au	9.918	7.827	0.174	Au	12.721	7.922	0.188	Au	15.515	8.032	0.198
Au	18.306	8.146	0.193	Au	21.102	8.252	0.176	Au	23.909	8.340	0.150
Au	26.732	8.401	0.129	Au	29.569	8.434	0.118	Au	32.413	8.442	0.114
Au	35.255	8.424	0.120	Au	38.087	8.378	0.137	Au	40.903	8.303	0.163
Au	43.704	8.206	0.187	Au	46.496	8.096	0.196	Au	49.288	7.982	0.186
Au	52.088	7.877	0.166	Au	54.901	7.789	0.144	Au	57.731	7.726	0.131
Au	60.575	7.686	0.143	Au	63.421	7.672	0.104	Au	-0.022	10.224	0.095
Au	2.838	10.243	0.107	Au	5.686	10.291	0.136	Au	8.517	10.342	0.151
Au	11.325	10.425	0.176	Au	14.122	10.530	0.191	Au	16.912	10.643	0.198
Au	19.704	10.754	0.186	Au	22.504	10.852	0.163	Au	25.319	10.928	0.138
Au	28.150	10.975	0.122	Au	30.991	10.995	0.115	Au	33.835	10.990	0.117
Au	36.672	10.958	0.127	Au	39.497	10.898	0.148	Au	42.305	10.811	0.175
Au	45.101	10.705	0.194	Au	47.891	10.592	0.195	Au	50.686	10.482	0.177
Au	53.491	10.384	0.152	Au	56.313	10.308	0.133	Au	59.150	10.256	0.127
Au	61.997	10.226	0.143	Au	1.411	12.780	0.130	Au	4.258	12.816	0.134
Au	7.102	12.866	0.144	Au	9.921	12.936	0.169	Au	12.725	13.031	0.179
Au	15.519	13.141	0.196	Au	18.308	13.254	0.193	Au	21.103	13.359	0.176
Au	23.910	13.447	0.150	Au	26.733	13.509	0.130	Au	29.569	13.542	0.118
Au	32.413	13.549	0.115	Au	35.255	13.531	0.121	Au	38.087	13.485	0.135
Au	40.903	13.411	0.162	Au	43.704	13.313	0.188	Au	46.496	13.203	0.196
Au	49.287	13.090	0.187	Au	52.086	12.985	0.163	Au	54.899	12.896	0.139
Au	57.729	12.833	0.126	Au	60.574	12.794	0.132	Au	63.423	12.771	0.133
Au	-0.005	1.684	-2.353	Au	1.481	4.250	-2.358	Au	2.925	6.774	-2.356

Au	4.391	9.355	-2.357	Au	5.858	11.913	-2.357	Au	7.335	14.469	-2.365
Au	2.917	1.684	-2.393	Au	4.376	4.254	-2.402	Au	5.857	6.815	-2.390
Au	7.330	9.369	-2.361	Au	8.803	11.918	-2.357	Au	10.278	14.469	-2.355
Au	5.860	1.697	-2.392	Au	7.330	4.255	-2.384	Au	8.803	6.808	-2.360
Au	10.277	9.360	-2.356	Au	11.752	11.913	-2.355	Au	13.234	14.468	-2.356
Au	8.808	1.699	-2.361	Au	10.278	4.251	-2.352	Au	11.753	6.804	-2.351
Au	13.232	9.356	-2.352	Au	14.715	11.909	-2.353	Au	16.199	14.460	-2.353
Au	11.754	1.701	-2.355	Au	13.232	4.253	-2.353	Au	14.714	6.802	-2.352
Au	16.196	9.351	-2.352	Au	17.681	11.900	-2.353	Au	19.166	14.449	-2.355
Au	14.716	1.697	-2.354	Au	16.198	4.245	-2.352	Au	17.681	6.792	-2.353
Au	19.165	9.341	-2.355	Au	20.648	11.890	-2.357	Au	22.129	14.440	-2.360
Au	17.683	1.686	-2.352	Au	19.166	4.233	-2.353	Au	20.647	6.783	-2.356
Au	22.128	9.333	-2.360	Au	23.607	11.884	-2.364	Au	25.084	14.437	-2.367
Au	20.649	1.676	-2.356	Au	22.129	4.226	-2.360	Au	23.607	6.777	-2.364
Au	25.083	9.329	-2.367	Au	26.557	11.882	-2.370	Au	28.028	14.436	-2.372
Au	23.608	1.670	-2.364	Au	25.083	4.222	-2.368	Au	26.556	6.775	-2.370
Au	28.027	9.329	-2.372	Au	29.496	11.883	-2.373	Au	30.965	14.436	-2.374
Au	26.557	1.669	-2.370	Au	28.027	4.222	-2.371	Au	29.496	6.775	-2.373
Au	30.965	9.329	-2.374	Au	32.433	11.883	-2.374	Au	33.901	14.436	-2.373
Au	29.497	1.669	-2.373	Au	30.965	4.222	-2.374	Au	32.433	6.776	-2.374
Au	33.901	9.329	-2.374	Au	35.370	11.882	-2.372	Au	36.841	14.436	-2.371
Au	32.433	1.668	-2.374	Au	33.901	4.222	-2.374	Au	35.371	6.775	-2.373
Au	36.842	9.328	-2.370	Au	38.315	11.882	-2.368	Au	39.790	14.437	-2.364
Au	35.370	1.668	-2.373	Au	36.842	4.222	-2.371	Au	38.315	6.775	-2.367
Au	39.791	9.330	-2.364	Au	41.269	11.886	-2.360	Au	42.749	14.443	-2.356
Au	38.314	1.668	-2.368	Au	39.790	4.223	-2.364	Au	41.269	6.778	-2.359
Au	42.749	9.336	-2.356	Au	44.231	11.895	-2.354	Au	45.714	14.454	-2.353
Au	41.269	1.672	-2.360	Au	42.749	4.229	-2.356	Au	44.231	6.787	-2.354
Au	45.714	9.347	-2.353	Au	47.199	11.906	-2.353	Au	48.683	14.464	-2.356
Au	44.231	1.680	-2.353	Au	45.715	4.240	-2.353	Au	47.199	6.799	-2.353
Au	48.683	9.357	-2.355	Au	50.166	11.914	-2.357	Au	51.647	14.469	-2.361
Au	47.199	1.691	-2.354	Au	48.683	4.250	-2.356	Au	50.166	6.807	-2.358
Au	51.648	9.361	-2.360	Au	53.127	11.914	-2.364	Au	54.603	14.467	-2.367

Au	50.166	1.700	-2.358	Au	51.647	4.255	-2.361	Au	53.127	6.808	-2.363
Au	54.603	9.358	-2.366	Au	56.077	11.909	-2.369	Au	57.547	14.460	-2.368
Au	53.127	1.701	-2.364	Au	54.603	4.253	-2.366	Au	56.076	6.802	-2.365
Au	57.547	9.351	-2.368	Au	59.015	11.901	-2.366	Au	60.477	14.452	-2.361
Au	56.076	1.697	-2.367	Au	57.547	4.246	-2.363	Au	59.013	6.794	-2.362
Au	60.478	9.344	-2.362	Au	61.940	11.897	-2.360	Au	63.401	14.454	-2.347
Au	59.013	1.688	-2.363	Au	60.475	4.237	-2.363	Au	61.935	6.790	-2.375
Au	63.398	9.348	-2.378	Au	64.865	11.905	-2.370	Au	66.320	14.453	-2.360
Au	61.936	1.681	-2.361	Au	63.400	4.235	-2.380	Au	64.858	6.799	-2.402
Au	66.330	9.352	-2.386	Au	67.793	11.908	-2.368	Au	69.258	14.458	-2.378
Au	1.464	0.847	-4.779	Au	2.940	3.405	-4.789	Au	4.418	5.966	-4.788
Au	5.895	8.525	-4.777	Au	7.369	11.073	-4.770	Au	8.845	13.623	-4.770
Au	4.418	0.850	-4.788	Au	5.896	3.408	-4.787	Au	7.370	5.967	-4.780
Au	8.843	8.519	-4.767	Au	10.316	11.069	-4.768	Au	11.792	13.621	-4.767
Au	7.371	0.854	-4.777	Au	8.846	3.409	-4.772	Au	10.318	5.963	-4.766
Au	11.791	8.515	-4.765	Au	13.265	11.066	-4.765	Au	14.741	13.619	-4.765
Au	10.320	0.854	-4.769	Au	11.793	3.408	-4.767	Au	13.266	5.961	-4.765
Au	14.741	8.512	-4.765	Au	16.216	11.064	-4.765	Au	17.691	13.616	-4.765
Au	13.267	0.854	-4.766	Au	14.742	3.406	-4.765	Au	16.216	5.957	-4.765
Au	17.691	8.509	-4.765	Au	19.166	11.061	-4.766	Au	20.641	13.613	-4.768
Au	16.217	0.850	-4.765	Au	17.691	3.402	-4.765	Au	19.166	5.954	-4.765
Au	20.641	8.506	-4.768	Au	22.116	11.058	-4.770	Au	23.591	13.612	-4.773
Au	19.166	0.847	-4.766	Au	20.641	3.399	-4.768	Au	22.115	5.952	-4.770
Au	23.590	8.504	-4.773	Au	25.065	11.058	-4.776	Au	26.540	13.611	-4.778
Au	22.116	0.845	-4.771	Au	23.591	3.397	-4.773	Au	25.065	5.950	-4.776
Au	26.539	8.504	-4.778	Au	28.014	11.058	-4.780	Au	29.488	13.611	-4.781
Au	25.065	0.843	-4.776	Au	26.540	3.397	-4.778	Au	28.014	5.950	-4.780
Au	29.488	8.504	-4.781	Au	30.961	11.058	-4.782	Au	32.435	13.611	-4.782
Au	28.014	0.843	-4.780	Au	29.488	3.397	-4.781	Au	30.962	5.951	-4.782
Au	32.435	8.504	-4.782	Au	33.909	11.058	-4.781	Au	35.383	13.611	-4.780
Au	30.961	0.843	-4.782	Au	32.435	3.397	-4.782	Au	33.909	5.951	-4.781
Au	35.383	8.504	-4.780	Au	36.857	11.058	-4.778	Au	38.332	13.611	-4.776
Au	33.909	0.843	-4.781	Au	35.383	3.397	-4.780	Au	36.857	5.950	-4.779

Au	38.332	8.504	-4.776	Au	39.806	11.058	-4.773	Au	41.281	13.612	-4.770
Au	36.857	0.843	-4.779	Au	38.332	3.397	-4.776	Au	39.806	5.950	-4.773
Au	41.281	8.505	-4.770	Au	42.755	11.060	-4.768	Au	44.230	13.615	-4.766
Au	39.806	0.844	-4.773	Au	41.281	3.398	-4.770	Au	42.755	5.952	-4.768
Au	44.230	8.507	-4.766	Au	45.705	11.063	-4.765	Au	47.180	13.619	-4.765
Au	42.755	0.845	-4.768	Au	44.230	3.400	-4.766	Au	45.705	5.956	-4.765
Au	47.180	8.511	-4.765	Au	48.655	11.067	-4.766	Au	50.131	13.622	-4.767
Au	45.705	0.849	-4.765	Au	47.179	3.404	-4.765	Au	48.655	5.960	-4.766
Au	50.131	8.515	-4.767	Au	51.607	11.070	-4.769	Au	53.083	13.623	-4.771
Au	48.655	0.853	-4.766	Au	50.131	3.408	-4.767	Au	51.607	5.962	-4.769
Au	53.082	8.516	-4.771	Au	54.558	11.069	-4.773	Au	56.033	13.621	-4.775
Au	51.607	0.855	-4.769	Au	53.083	3.409	-4.771	Au	54.558	5.962	-4.773
Au	56.033	8.514	-4.774	Au	57.509	11.067	-4.775	Au	58.982	13.619	-4.776
Au	54.558	0.855	-4.773	Au	56.034	3.407	-4.774	Au	57.507	5.959	-4.773
Au	58.981	8.512	-4.775	Au	60.455	11.066	-4.775	Au	61.928	13.622	-4.769
Au	57.508	0.852	-4.775	Au	58.979	3.403	-4.774	Au	60.449	5.955	-4.777
Au	61.923	8.511	-4.780	Au	63.396	11.068	-4.778	Au	64.865	13.622	-4.772
Au	60.453	0.849	-4.774	Au	61.922	3.400	-4.777	Au	63.394	5.954	-4.788
Au	64.870	8.515	-4.790	Au	66.343	11.070	-4.781	Au	67.810	13.621	-4.776
Au	63.397	0.850	-4.768	Au	64.870	3.402	-4.770	Au	66.344	5.958	-4.781
Au	67.819	8.515	-4.771	Au	69.289	11.071	-4.771	Au	70.763	13.619	-4.772
Au	0.000	0.000	-7.223	Au	1.474	2.554	-7.223	Au	2.949	5.107	-7.223
Au	4.423	7.661	-7.223	Au	5.897	10.214	-7.223	Au	7.372	12.768	-7.223
Au	2.949	0.000	-7.223	Au	4.423	2.554	-7.223	Au	5.897	5.107	-7.223
Au	7.372	7.661	-7.223	Au	8.846	10.214	-7.223	Au	10.320	12.768	-7.223
Au	5.897	0.000	-7.223	Au	7.372	2.554	-7.223	Au	8.846	5.107	-7.223
Au	10.320	7.661	-7.223	Au	11.795	10.214	-7.223	Au	13.269	12.768	-7.223
Au	8.846	0.000	-7.223	Au	10.320	2.554	-7.223	Au	11.795	5.107	-7.223
Au	13.269	7.661	-7.223	Au	14.743	10.214	-7.223	Au	16.217	12.768	-7.223
Au	11.795	0.000	-7.223	Au	13.269	2.554	-7.223	Au	14.743	5.107	-7.223
Au	16.217	7.661	-7.223	Au	17.692	10.214	-7.223	Au	19.166	12.768	-7.223
Au	14.743	0.000	-7.223	Au	16.217	2.554	-7.223	Au	17.692	5.107	-7.223
Au	19.166	7.661	-7.223	Au	20.640	10.214	-7.223	Au	22.115	12.768	-7.223

Au	17.692	0.000	-7.223	Au	19.166	2.554	-7.223	Au	20.640	5.107	-7.223
Au	22.115	7.661	-7.223	Au	23.589	10.214	-7.223	Au	25.063	12.768	-7.223
Au	20.640	0.000	-7.223	Au	22.115	2.554	-7.223	Au	23.589	5.107	-7.223
Au	25.063	7.661	-7.223	Au	26.538	10.214	-7.223	Au	28.012	12.768	-7.223
Au	23.589	0.000	-7.223	Au	25.063	2.554	-7.223	Au	26.538	5.107	-7.223
Au	28.012	7.661	-7.223	Au	29.486	10.214	-7.223	Au	30.961	12.768	-7.223
Au	26.538	0.000	-7.223	Au	28.012	2.554	-7.223	Au	29.486	5.107	-7.223
Au	30.961	7.661	-7.223	Au	32.435	10.214	-7.223	Au	33.909	12.768	-7.223
Au	29.486	0.000	-7.223	Au	30.961	2.554	-7.223	Au	32.435	5.107	-7.223
Au	33.909	7.661	-7.223	Au	35.384	10.214	-7.223	Au	36.858	12.768	-7.223
Au	32.435	0.000	-7.223	Au	33.909	2.554	-7.223	Au	35.384	5.107	-7.223
Au	36.858	7.661	-7.223	Au	38.332	10.214	-7.223	Au	39.807	12.768	-7.223
Au	35.384	0.000	-7.223	Au	36.858	2.554	-7.223	Au	38.332	5.107	-7.223
Au	39.807	7.661	-7.223	Au	41.281	10.214	-7.223	Au	42.755	12.768	-7.223
Au	38.332	0.000	-7.223	Au	39.807	2.554	-7.223	Au	41.281	5.107	-7.223
Au	42.755	7.661	-7.223	Au	44.230	10.214	-7.223	Au	45.704	12.768	-7.223
Au	41.281	0.000	-7.223	Au	42.755	2.554	-7.223	Au	44.230	5.107	-7.223
Au	45.704	7.661	-7.223	Au	47.178	10.214	-7.223	Au	48.652	12.768	-7.223
Au	44.230	0.000	-7.223	Au	45.704	2.554	-7.223	Au	47.178	5.107	-7.223
Au	48.652	7.661	-7.223	Au	50.127	10.214	-7.223	Au	51.601	12.768	-7.223
Au	47.178	0.000	-7.223	Au	48.652	2.554	-7.223	Au	50.127	5.107	-7.223
Au	51.601	7.661	-7.223	Au	53.075	10.214	-7.223	Au	54.550	12.768	-7.223
Au	50.127	0.000	-7.223	Au	51.601	2.554	-7.223	Au	53.075	5.107	-7.223
Au	54.550	7.661	-7.223	Au	56.024	10.214	-7.223	Au	57.498	12.768	-7.223
Au	53.075	0.000	-7.223	Au	54.550	2.554	-7.223	Au	56.024	5.107	-7.223
Au	57.498	7.661	-7.223	Au	58.973	10.214	-7.223	Au	60.447	12.768	-7.223
Au	56.024	0.000	-7.223	Au	57.498	2.554	-7.223	Au	58.973	5.107	-7.223
Au	60.447	7.661	-7.223	Au	61.921	10.214	-7.223	Au	63.396	12.768	-7.223
Au	58.973	0.000	-7.223	Au	60.447	2.554	-7.223	Au	61.921	5.107	-7.223
Au	63.396	7.661	-7.223	Au	64.870	10.214	-7.223	Au	66.344	12.768	-7.223
Au	61.921	0.000	-7.223	Au	63.396	2.554	-7.223	Au	64.870	5.107	-7.223
Au	66.344	7.661	-7.223	Au	67.819	10.214	-7.223	Au	69.293	12.768	-7.223

Table S4: CoPyr monolayer on unreconstructed Au(111) surface

Atom	x	y	z	Atom	x	y	z	Atom	x	y	z
Co	-0.361	-0.145	3.037	N	0.182	-1.954	3.165	N	-2.212	-0.524	3.134
N	1.483	0.231	3.180	N	-0.912	1.662	3.144	N	-3.356	-5.183	2.895
N	2.657	4.837	2.669	C	-0.028	-4.373	3.189	C	1.344	-4.529	3.244
C	2.151	-3.386	3.266	C	1.547	-2.132	3.234	C	-0.614	-3.075	3.152
C	-2.041	-2.962	3.085	C	-2.759	-4.171	2.999	C	-2.819	-1.760	3.133
C	-4.238	-1.859	3.160	C	-5.030	-0.727	3.216	C	-4.409	0.526	3.247
C	-3.019	0.592	3.207	C	2.287	-0.885	3.263	C	3.673	-0.818	3.349
C	4.290	0.437	3.364	C	3.502	1.567	3.275	C	2.089	1.464	3.175
C	1.311	2.664	3.047	C	2.035	3.854	2.877	C	-0.117	2.783	3.136
C	-2.277	1.838	3.220	C	-2.878	3.092	3.281	C	-2.070	4.234	3.272
C	-0.698	4.079	3.201	H	-0.686	-5.242	3.183	H	1.785	-5.526	3.250
H	3.236	-3.470	3.288	H	-4.689	-2.852	3.152	H	-6.117	-0.814	3.222
H	-4.999	1.440	3.279	H	4.259	-1.734	3.394	H	5.374	0.529	3.430
H	3.951	2.560	3.276	H	-3.963	3.176	3.317	H	-2.509	5.232	3.309
H	-0.040	4.949	3.199	Co	12.350	-0.227	2.970	N	13.047	-1.984	3.096
N	10.546	-0.759	3.115	N	14.165	0.300	3.088	N	11.659	1.527	3.119
N	9.743	-5.487	3.052	N	14.918	5.020	2.744	C	13.037	-4.410	3.189
C	14.417	-4.453	3.229	C	15.128	-3.246	3.233	C	14.423	-2.048	3.174
C	12.344	-3.169	3.131	C	10.913	-3.177	3.099	C	10.285	-4.442	3.081
C	10.043	-2.041	3.136	C	8.636	-2.256	3.194	C	7.755	-1.196	3.199
C	8.270	0.107	3.170	C	9.650	0.286	3.154	C	15.060	-0.746	3.168
C	16.440	-0.566	3.220	C	16.956	0.734	3.200	C	16.073	1.797	3.143
C	14.669	1.581	3.101	C	13.792	2.714	3.051	C	14.404	3.971	2.919
C	12.360	2.708	3.141	C	10.285	1.590	3.170	C	9.580	2.789	3.222
C	10.294	3.992	3.263	C	11.673	3.951	3.230	H	12.452	-5.331	3.199
H	14.940	-5.409	3.257	H	16.216	-3.240	3.266	H	8.271	-3.282	3.214
H	6.680	-1.375	3.202	H	7.612	0.974	3.159	H	17.103	-1.429	3.256
H	18.032	0.910	3.217	H	16.440	2.823	3.148	H	8.491	2.786	3.223
H	9.770	4.948	3.296	H	12.260	4.869	3.264	Co	6.336	11.114	2.898

N	5.790	9.320	3.081	N	4.585	11.820	3.031	N	8.086	10.422	3.093
N	6.886	12.925	3.005	N	1.037	8.561	3.037	N	11.650	13.652	3.183
C	4.284	7.423	3.088	C	5.341	6.534	3.176	C	6.641	7.043	3.238
C	6.830	8.422	3.185	C	4.505	8.826	3.073	C	3.370	9.699	3.032
C	2.096	9.078	3.040	C	3.392	11.131	3.077	C	2.157	11.837	3.156
C	2.124	13.218	3.192	C	3.341	13.913	3.161	C	4.535	13.199	3.083
C	8.136	9.050	3.213	C	9.325	8.339	3.334	C	10.541	9.029	3.334
C	10.509	10.408	3.240	C	9.279	11.115	3.140	C	9.304	12.547	3.087
C	10.583	13.157	3.132	C	8.175	13.423	3.054	C	5.843	13.826	3.057
C	6.031	15.207	3.059	C	7.338	15.717	3.062	C	8.398	14.831	3.065
H	3.265	7.040	3.056	H	5.141	5.462	3.177	H	7.500	6.377	3.299
H	1.232	11.261	3.187	H	1.168	13.742	3.239	H	3.362	15.001	3.184
H	9.301	7.254	3.413	H	11.502	8.515	3.396	H	11.437	10.980	3.251
H	5.174	15.877	3.081	H	7.537	16.790	3.053	H	9.420	15.212	3.102
Co	19.196	11.034	2.895	N	18.557	9.266	3.059	N	17.493	11.827	3.121
N	20.914	10.233	2.992	N	19.847	12.806	3.046	N	13.784	8.756	3.184
N	24.664	13.207	2.885	C	16.944	7.450	3.145	C	17.949	6.505	3.128
C	19.281	6.939	3.098	C	19.548	8.306	3.082	C	17.248	8.841	3.123
C	16.167	9.776	3.150	C	14.863	9.226	3.170	C	16.267	11.201	3.189
C	15.074	11.972	3.284	C	15.113	13.352	3.326	C	16.366	13.978	3.297
C	17.518	13.202	3.207	C	20.889	8.856	3.071	C	22.042	8.074	3.116
C	23.293	8.704	3.111	C	23.338	10.086	3.059	C	22.143	10.860	3.020
C	22.241	12.289	2.982	C	23.553	12.815	2.947	C	21.158	13.230	3.051
C	18.856	13.759	3.169	C	19.120	15.123	3.226	C	20.449	15.561	3.172
C	21.457	14.618	3.102	H	15.903	7.127	3.179	H	17.697	5.443	3.122
H	20.101	6.223	3.072	H	14.119	11.448	3.314	H	14.182	13.920	3.370
H	16.447	15.063	3.326	H	21.960	6.990	3.173	H	24.221	8.129	3.134
H	24.296	10.606	3.086	H	18.301	15.837	3.294	H	20.711	16.619	3.194
H	22.498	14.946	3.087	Au	-0.040	-0.037	0.252	Au	1.461	2.496	-0.012
Au	2.948	5.111	0.087	Au	4.435	7.667	0.020	Au	5.941	10.279	0.159
Au	7.393	12.765	-0.025	Au	8.851	15.310	0.017	Au	10.309	17.841	0.046
Au	11.792	20.411	-0.002	Au	2.959	-0.019	-0.019	Au	4.429	2.540	0.033
Au	5.910	5.101	0.039	Au	7.382	7.661	0.012	Au	8.879	10.210	-0.034

Au	10.340	12.765	-0.021	Au	11.813	15.311	0.053	Au	13.276	17.866	0.044
Au	14.766	20.418	-0.007	Au	5.905	0.000	0.026	Au	7.364	2.564	0.049
Au	8.848	5.111	0.041	Au	10.329	7.655	0.043	Au	11.814	10.216	0.032
Au	13.282	12.770	0.032	Au	14.754	15.333	0.040	Au	16.239	17.873	0.042
Au	17.714	20.428	0.044	Au	8.846	0.019	-0.006	Au	10.313	2.555	-0.023
Au	11.802	5.117	0.038	Au	13.276	7.681	0.069	Au	14.765	10.231	-0.001
Au	16.215	12.794	-0.036	Au	17.705	15.337	0.024	Au	19.173	17.887	0.060
Au	20.650	20.426	0.033	Au	11.856	-0.020	0.204	Au	13.277	2.556	-0.018
Au	14.772	5.151	0.069	Au	16.252	7.683	0.013	Au	17.715	10.238	0.041
Au	19.164	12.761	0.020	Au	20.652	15.334	0.015	Au	22.121	17.875	0.035
Au	23.598	20.431	-0.009	Au	14.764	-0.005	-0.050	Au	16.245	2.549	0.005
Au	17.720	5.097	0.013	Au	19.199	7.641	-0.046	Au	20.629	10.230	0.009
Au	22.128	12.777	-0.041	Au	23.608	15.338	0.010	Au	25.087	17.870	-0.011
Au	26.549	20.422	-0.052	Au	17.710	-0.007	0.028	Au	19.179	2.553	0.059
Au	20.660	5.089	0.045	Au	22.131	7.645	0.014	Au	23.611	10.215	0.011
Au	25.097	12.786	0.069	Au	26.558	15.333	0.039	Au	28.027	17.877	0.027
Au	29.504	20.424	0.009	Au	20.636	0.009	0.030	Au	22.113	2.553	0.023
Au	23.588	5.102	0.026	Au	25.067	7.654	0.023	Au	26.545	10.220	0.026
Au	28.028	12.776	0.028	Au	29.490	15.339	0.030	Au	30.962	17.887	0.058
Au	32.436	20.433	0.059	Au	23.584	0.004	-0.037	Au	25.054	2.547	-0.051
Au	26.522	5.098	0.004	Au	27.994	7.659	0.038	Au	29.509	10.222	-0.010
Au	30.975	12.797	-0.062	Au	32.432	15.352	0.001	Au	33.901	17.893	0.023
Au	35.371	20.434	0.011	Au	0.005	1.664	-2.390	Au	1.487	4.250	-2.375
Au	2.952	6.798	-2.365	Au	4.457	9.369	-2.367	Au	5.908	11.901	-2.421
Au	7.373	14.472	-2.405	Au	8.847	17.026	-2.393	Au	10.321	19.569	-2.388
Au	11.820	22.132	-2.385	Au	2.961	1.700	-2.407	Au	4.419	4.261	-2.367
Au	5.904	6.803	-2.394	Au	7.361	9.367	-2.383	Au	8.857	11.916	-2.431
Au	10.333	14.478	-2.403	Au	11.797	17.023	-2.377	Au	13.277	19.568	-2.398
Au	14.722	22.140	-2.371	Au	5.903	1.704	-2.403	Au	7.378	4.257	-2.401
Au	8.855	6.811	-2.400	Au	10.335	9.355	-2.410	Au	11.810	11.913	-2.409
Au	13.277	14.476	-2.391	Au	14.753	17.033	-2.393	Au	16.230	19.582	-2.404
Au	17.702	22.125	-2.412	Au	8.841	1.712	-2.414	Au	10.330	4.266	-2.405
Au	11.806	6.816	-2.383	Au	13.280	9.358	-2.396	Au	14.744	11.923	-2.421

Au	16.224	14.491	-2.416	Au	17.705	17.035	-2.402	Au	19.176	19.580	-2.399
Au	20.650	22.131	-2.407	Au	11.800	1.683	-2.376	Au	13.282	4.270	-2.377
Au	14.748	6.813	-2.374	Au	16.242	9.372	-2.398	Au	17.702	11.920	-2.419
Au	19.174	14.468	-2.391	Au	20.644	17.034	-2.395	Au	22.121	19.584	-2.400
Au	23.618	22.153	-2.363	Au	14.755	1.713	-2.420	Au	16.215	4.267	-2.387
Au	17.698	6.803	-2.416	Au	19.174	9.368	-2.417	Au	20.646	11.919	-2.422
Au	22.123	14.481	-2.410	Au	23.591	17.030	-2.409	Au	25.065	19.578	-2.427
Au	26.526	22.147	-2.414	Au	17.706	1.701	-2.405	Au	19.178	4.250	-2.403
Au	20.660	6.797	-2.421	Au	22.117	9.367	-2.386	Au	23.615	11.920	-2.395
Au	25.077	14.469	-2.388	Au	26.553	17.021	-2.414	Au	28.025	19.578	-2.419
Au	29.499	22.130	-2.420	Au	20.641	1.700	-2.406	Au	22.124	4.253	-2.414
Au	23.601	6.808	-2.411	Au	25.076	9.359	-2.403	Au	26.543	11.921	-2.384
Au	28.022	14.472	-2.399	Au	29.498	17.032	-2.405	Au	30.974	19.577	-2.406
Au	32.442	22.127	-2.405	Au	23.583	1.702	-2.433	Au	25.070	4.256	-2.425
Au	26.549	6.809	-2.403	Au	28.024	9.356	-2.395	Au	29.485	11.914	-2.417
Au	30.966	14.483	-2.426	Au	32.439	17.033	-2.409	Au	33.909	19.582	-2.406
Au	35.384	22.128	-2.416	Au	1.479	0.848	-4.795	Au	2.954	3.409	-4.789
Au	4.423	5.958	-4.784	Au	5.898	8.509	-4.789	Au	7.374	11.058	-4.806
Au	8.850	13.623	-4.798	Au	10.325	16.177	-4.792	Au	11.798	18.723	-4.787
Au	13.274	21.277	-4.793	Au	4.425	0.853	-4.800	Au	5.893	3.413	-4.787
Au	7.373	5.960	-4.795	Au	8.844	8.512	-4.793	Au	10.327	11.063	-4.803
Au	11.800	13.621	-4.796	Au	13.269	16.176	-4.786	Au	14.745	18.728	-4.798
Au	16.213	21.284	-4.791	Au	7.373	0.855	-4.802	Au	8.848	3.410	-4.800
Au	10.324	5.962	-4.795	Au	11.799	8.508	-4.795	Au	13.272	11.062	-4.801
Au	14.743	13.626	-4.799	Au	16.218	16.181	-4.799	Au	17.695	18.732	-4.797
Au	19.170	21.282	-4.801	Au	10.324	0.854	-4.792	Au	11.800	3.405	-4.781
Au	13.269	5.959	-4.786	Au	14.748	8.507	-4.784	Au	16.219	11.066	-4.802
Au	17.695	13.625	-4.800	Au	19.169	16.175	-4.790	Au	20.642	18.731	-4.796
Au	22.124	21.287	-4.788	Au	13.267	0.859	-4.802	Au	14.742	3.414	-4.796
Au	16.214	5.960	-4.796	Au	17.695	8.511	-4.803	Au	19.170	11.067	-4.810
Au	20.644	13.624	-4.801	Au	22.115	16.175	-4.799	Au	23.588	18.726	-4.804
Au	25.058	21.285	-4.801	Au	16.219	0.856	-4.804	Au	17.688	3.410	-4.790
Au	19.169	5.958	-4.802	Au	20.650	8.515	-4.800	Au	22.126	11.065	-4.792

Au	23.594	13.618	-4.793	Au	25.065	16.167	-4.794	Au	26.540	18.725	-4.806
Au	28.009	21.284	-4.803	Au	19.166	0.852	-4.800	Au	20.642	3.405	-4.800
Au	22.123	5.958	-4.806	Au	23.594	8.516	-4.793	Au	25.072	11.066	-4.793
Au	26.541	13.616	-4.791	Au	28.016	16.168	-4.799	Au	29.489	18.727	-4.802
Au	30.962	21.280	-4.802	Au	22.115	0.848	-4.809	Au	23.596	3.405	-4.812
Au	25.074	5.960	-4.803	Au	26.547	8.510	-4.798	Au	28.010	11.060	-4.793
Au	29.487	13.615	-4.802	Au	30.963	16.174	-4.806	Au	32.440	18.727	-4.802
Au	33.913	21.279	-4.805	Au	25.070	0.846	-4.802	Au	26.552	3.400	-4.786
Au	28.022	5.955	-4.788	Au	29.495	8.504	-4.775	Au	30.959	11.056	-4.798
Au	32.439	13.616	-4.805	Au	33.915	16.174	-4.796	Au	35.389	18.726	-4.795
Au	36.868	21.276	-4.789	Au	0.000	0.000	-7.223	Au	1.474	2.554	-7.223
Au	2.949	5.107	-7.223	Au	4.423	7.661	-7.223	Au	5.897	10.214	-7.223
Au	7.372	12.768	-7.223	Au	8.846	15.322	-7.223	Au	10.320	17.875	-7.223
Au	11.795	20.429	-7.223	Au	2.949	0.000	-7.223	Au	4.423	2.554	-7.223
Au	5.897	5.107	-7.223	Au	7.372	7.661	-7.223	Au	8.846	10.214	-7.223
Au	10.320	12.768	-7.223	Au	11.795	15.322	-7.223	Au	13.269	17.875	-7.223
Au	14.743	20.429	-7.223	Au	5.897	0.000	-7.223	Au	7.372	2.554	-7.223
Au	8.846	5.107	-7.223	Au	10.320	7.661	-7.223	Au	11.795	10.214	-7.223
Au	13.269	12.768	-7.223	Au	14.743	15.322	-7.223	Au	16.217	17.875	-7.223
Au	17.692	20.429	-7.223	Au	8.846	0.000	-7.223	Au	10.320	2.554	-7.223
Au	11.795	5.107	-7.223	Au	13.269	7.661	-7.223	Au	14.743	10.214	-7.223
Au	16.217	12.768	-7.223	Au	17.692	15.322	-7.223	Au	19.166	17.875	-7.223
Au	20.640	20.429	-7.223	Au	11.795	0.000	-7.223	Au	13.269	2.554	-7.223
Au	14.743	5.107	-7.223	Au	16.217	7.661	-7.223	Au	17.692	10.214	-7.223
Au	19.166	12.768	-7.223	Au	20.640	15.322	-7.223	Au	22.115	17.875	-7.223
Au	23.589	20.429	-7.223	Au	14.743	0.000	-7.223	Au	16.217	2.554	-7.223
Au	17.692	5.107	-7.223	Au	19.166	7.661	-7.223	Au	20.640	10.214	-7.223
Au	22.115	12.768	-7.223	Au	23.589	15.322	-7.223	Au	25.063	17.875	-7.223
Au	26.538	20.429	-7.223	Au	17.692	0.000	-7.223	Au	19.166	2.554	-7.223
Au	20.640	5.107	-7.223	Au	22.115	7.661	-7.223	Au	23.589	10.214	-7.223
Au	25.063	12.768	-7.223	Au	26.538	15.322	-7.223	Au	28.012	17.875	-7.223
Au	29.486	20.429	-7.223	Au	20.640	0.000	-7.223	Au	22.115	2.554	-7.223
Au	23.589	5.107	-7.223	Au	25.063	7.661	-7.223	Au	26.538	10.214	-7.223

Au	28.012	12.768	-7.223	Au	29.486	15.322	-7.223	Au	30.961	17.875	-7.223
Au	32.435	20.429	-7.223	Au	23.589	0.000	-7.223	Au	25.063	2.554	-7.223
Au	26.538	5.107	-7.223	Au	28.012	7.661	-7.223	Au	29.486	10.214	-7.223
Au	30.961	12.768	-7.223	Au	32.435	15.322	-7.223	Au	33.909	17.875	-7.223
Au	35.384	20.429	-7.223								

References

- [1] Y. Gurdal, J. Hutter and M. Iannuzzi, unpublished work.